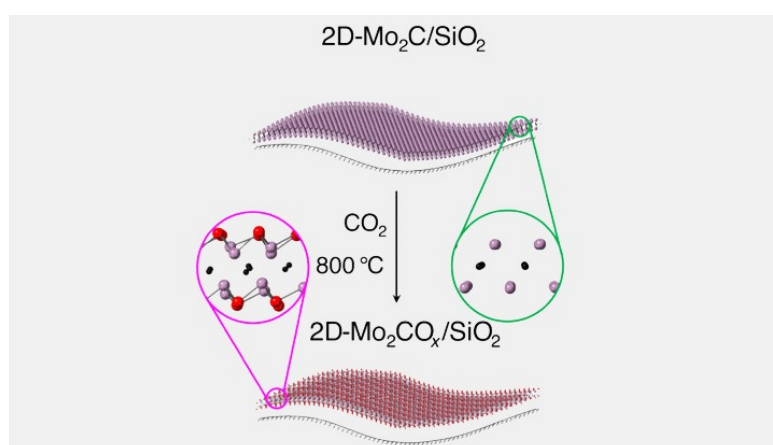


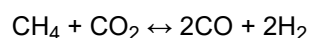
20/10/2020

## Catalitzadors bidimensionals per convertir el CO2 en un producte de major valor afegit



Un equip de recerca internacional on ha participat l'investigador Aleix Comas Vives ha aconseguit accelerar la transformació de diòxid de carboni i metà, dos gasos que contribueixen a l'escalfament global, en monòxid de carboni i hidrogen, una barreja amb valor afegit, mitjançant làmines de Mxens, un innovador catalitzador bidimensional.

La reacció de reformació seca del metà transforma el diòxid de carboni (CO<sub>2</sub>) i el metà (CH<sub>4</sub>) en una barreja de CO i H<sub>2</sub>.



La reacció permet assolir dos objectius. En primer lloc, permet valoritzar el CO<sub>2</sub> i el CH<sub>4</sub>, dos components que contribueixen en gran mesura a l'escalfament global del planeta. D'altra banda, la reacció forma un producte de més alt valor afegit, una barreja de CO i H<sub>2</sub> que s'anomena gas de síntesi, que com el seu nom indica serveix de punt de partida per sintetitzar un gran nombre de molècules que contenen carboni: hidrocarburs, alcohols, etc.

Generalment, la reacció de reformació seca del CO<sub>2</sub> s'accelera (es catalitza, en termes químics) mitjançant catalitzadors metàl·lics formats per metalls de transició, sobretot de níquel a nivell

industrial.

El níquel, però, presenta problemes, perquè al llarg de la reacció es forma carboni que s'adsorbeix a la seva superfície, i aquest es desactiva al llarg de la reacció. Resulta, per tant, atractiu desenvolupar nous materials que permetin accelerar la reacció i serveixin d'alternativa al níquel o als metalls de transició. Els carburs metàl·lics basats en molibdè (Mo<sub>2</sub>C) són materials atractius per a aquest propòsit, però també es desactiven, en aquest cas mitjançant oxigen adsorbit en la seva superfície.

En aquest treball, fruit d'una col·laboració del grup teòric liderat per l'Investigador "Ramon y Cajal" Aleix Comas Vives, del Departament de Química de la Universitat Autònoma de Barcelona, i el grup del professor Christoph Mueller i del doctor Alexey Fedorov, de l'escola Politècnica de Zurich (ETH Zurich), hem aconseguit sintetitzar i entendre com opera un catalitzador bidimensional de Mo<sub>2</sub>C a escala nanomètrica de la família dels MXens, quan es dipositen sobre SiO<sub>2</sub>. El catalitzador és actiu en la reacció i la seva morfologia permet superar les limitacions tradicionals del Mo<sub>2</sub>C.

Aquest compost, format per làmines molt fines, de Mo-C-Mo sobre el CO<sub>2</sub>, a diferència del Mo<sub>2</sub>C s'activa per deposició d'oxigen a la superfície, formant-se Mo<sub>2</sub>CO<sub>x</sub>. Això s'aconsegueix mitjançant el contacte del material amb CO<sub>2</sub> a 800 graus centígrads. El material resultant permet accelerar la reacció de reformació seca del metà amb una activitat similar a la del níquel. Aquest catalitzador Mo<sub>2</sub>CO<sub>x</sub>, té l'avantatge que, malgrat desactivar-se, és a dir fer-se menys eficient durant la reacció, es pot tornar a "activar" si es torna a posar en contacte amb CO<sub>2</sub>, fet sense precedents en materials d'aquest tipus. Això permet alternar cicles de reacció de reformació seca del metà amb cicles de reactivació del material amb CO<sub>2</sub> a altra temperatura.

Els càlculs teòrics han permès saber la composició del catalitzador en els diferents cicles de reacció i saber com té lloc la reacció a escala atòmica. En aquest sentit, s'ha vist que trencar la molècula del metà és el pas clau de la reacció de reformació seca del metà.

### Aleix Comas

Investigador Ramón y Cajal

Departament de Química

Universitat Autònoma de Barcelona

[Aleix.Comas@uab.cat](mailto:Aleix.Comas@uab.cat)

### Referències

Alexey Kurlov, Evgeniya B. Deeva, Paula M. Abdala, Dmitry Lebedev, Athanasia Tsoukalou, Aleix Comas-Vives, Alexey Fedorov & Christoph R. Müller, **Exploiting two-dimensional morphology of molybdenum oxycarbide to enable efficient catalytic dry reforming of methane**. *NATURE COMMUNICATIONS* (2020) <https://doi.org/10.1038/s41467-020-18721-0>

[View low-bandwidth version](#)